

Simulations numériques d'écoulements bidimensionnels non isothermes de fluides non-newtoniens avec prise en compte de la cristallisation induite

Adel Chine, Amine Ammar, Magdeleine Normandin & Jean-Robert Clermont

Université de Grenoble, Laboratoire de Rhéologie

BP No 53, Domaine Universitaire, 38041 Grenoble Cedex 9, FRANCE

Email : chine@ujf-grenoble.fr

Résumé :

Dans cette étude, nous prenons en compte, dans des simulations numériques 2D, des écoulements de polymères non amorphes, représentés par des modèles de comportement de fluides anélastiques (lois de puissance, de Carreau) et viscoélastiques (loi intégrale de Wagner) associés à une dépendance thermique. Le calcul des inconnues est effectué en considérant les problèmes mécanique, thermique et de cristallisation sous écoulement. Le problème mécanique (isotherme), résolu dans le cadre de la Méthode des Tubes de Courant (MTC) à partir d'un domaine rectangulaire où les lignes de courant sont parallèles, et pour lequel la prise en compte des lois de comportement intégrales est considérablement simplifiée, est résolu à partir d'une discrétisation par différences finies. La thermique est calculée par éléments finis et la cristallisation, par des schémas aux différences finies appliqués aux lignes de courant. Les écoulements se rapportent à des convergents et conduites avec rétrécissement (paroi en forme de cloche) ainsi qu'à la transition adhérence-glissement.

Abstract :

In this study, we consider 2D numerical flow simulations of non-amorphous polymers obeying inelastic (power-law, Carreau law) and viscoelastic (Wagner integral law) models with thermo-dependent properties. The computation of the unknowns is performed by considering successively the mechanical (isothermal), thermal and cristallization problems. The mechanical problem is solved by the means of the Stream-Tube Method (STM), based on calculation of an unknown transformation of streamlines from a mapped domain where the streamlines are rectilinear and parallel, allowing to simplify notably the evaluation of memory-integral models. Thermal effects are computed by using finite elements and the cristallization is solved by finite differences associated to the streamlines. The flows are computed in ducts involving converging or shrinking sections and in conditions of planar and axisymmetric stick-slip problem.

Mots-clé :

Méthode des Tubes de Courant, écoulements bidimensionnels, cristallisation sous écoulement

1 Introduction

L'étude numérique des écoulements et procédés pour fluides complexes et matières plastiques rend nécessaire de disposer de modèles pour le comportement rhéologique, d'une part, et pour des phénomènes physiques à décrire, d'autre part. Nous considérons dans ce travail les polymères comme incompressibles et, compte tenu de leurs propriétés physiques, ils obéissent à une loi constitutive plus complexe que celle du liquide newtonien. La littérature comporte de nombreuses études théoriques, expérimentales et numériques relatives à des procédés mettant en œuvre des polymères (e. g. Tadmor *et al.*, 1979) et en particulier des travaux relatifs à leur cristallisation (e.g. Ammar, 2001). Ce phénomène peut se produire sous des actions thermiques (cristallisation naturelle), mécaniques (cristallisation induite) ou sous leur action simultanée et il est donc nécessaire de prendre en compte l'influence de ces deux actions. Dans ce cadre, nous envisagerons, en particulier, des lois constitutives et des modèles de cristallisation de polymères en cours d'écoulement, qui seront considérés dans le contexte des lois de conservation de la masse, des quantités de mouvement et de l'énergie.

2 Equations gouvernantes

En négligeant les forces de volume et d'inertie, les lois de conservation sont les suivantes :

$$1) \text{ Conservation de la masse : } \nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (1)$$

où $\nabla \cdot$ désigne l'opérateur divergence, \underline{v} le vecteur vitesse.

$$2) \text{ Conservation des quantités de mouvement : } -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\tau} = \underline{0} \quad (2)$$

où p désigne la pression et $\underline{\tau}$ le tenseur des extra-contraintes, lié au tenseur des contraintes totales $\underline{\sigma}$ par l'équation $\underline{\sigma} = -p \underline{I} + \underline{\tau}$, \underline{I} étant le tenseur unité.

$$3) \text{ Conservation de l'énergie : } \rho C_p \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T + \underline{\tau} : \underline{D} \quad (3)$$

où ρ la densité du fluide, \underline{D} désigne le tenseur des taux de déformation, T la température. On peut décrire, par le facteur de translation a_T , la dépendance en température de paramètres rhéologiques tels que la viscosité η et le temps de relaxation λ associé à un fluide viscoélastique, donnés par les relations $\eta(T) = a_T(T) \eta(T_0)$, $\lambda(T) = a_T(T) \lambda(T_0)$, pour lesquelles $\eta(T_0)$ et $\lambda(T_0)$ désignent respectivement la viscosité et le temps de relaxation à une température de référence T_0 . Le facteur de translation a_T obéit à la loi WLF (William-Landel-Ferry) (Ferry, 1980) donnée par :

$$\log a_T = -\frac{C_1(T - T_0)}{C_2 + T - T_0} \quad (5)$$

où C_1 et C_2 sont des paramètres.

3 Modélisation

Les lois rhéologiques, anélastiques et viscoélastiques, sont écrites d'abord dans le cas isotherme :

$$(i) \text{ loi newtonienne : } \underline{\tau} = 2 \eta_0 \underline{D} \quad , \eta_0 \text{ étant la viscosité constante du fluide.} \quad (6)$$

$$(ii) \text{ lois non newtoniennes purement visqueuses : } \underline{\tau} = 2 \eta(\underline{D}) \underline{D} \quad (7)$$

dont deux modèles sont retenus :

- modèle en loi de puissance , où la fonction de viscosité est donnée par :

$$\eta(\dot{\gamma}) = m \left| \dot{\gamma} \right|^{(n-1)} \text{ avec } \dot{\gamma} = \left(4 \left| II_D \right| \right)^{\frac{1}{2}}, \text{ taux de cisaillement généralisé} \quad (8)$$

II_D désigne le deuxième invariant de \underline{D} avec les paramètres d'un Nylon à 498K (Tadmor, 1979) : $\eta(0) = 1600 \left[\frac{\text{Pa.s}}{\text{}} \right]; m = 2620 \left[\frac{\text{Pa.s}^n}{\text{}} \right]; n = 0.63$

- modèle de Carreau-Yasuda (Bird *et al.*, 1989) :

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta(\infty) + \frac{(\eta(0) - \eta(\infty))}{\left[1 + \left(\lambda \dot{\gamma} \right)^2 \right]^{\frac{(1-n)}{2}}} \quad (9)$$

où l'on a : $\frac{\eta_\infty}{\eta_0} = 0.0$, $a = 2$, $n = 0.63$, $K = 0.27 \text{ s}$; $\eta(0) = 1600 \text{ Pa.s}$

(iii) loi viscoélastique : modèle intégral multi-mode de Wagner (Guillet *et al.*, 1999, PEBDL à 433K)

$$\underline{\tau}(t) = \int_{-\infty}^t \sum_{p=1}^7 \frac{a_p}{\lambda_p} \exp\left(-\frac{(t-t')}{\lambda_p}\right) \frac{\underline{C}^{-1}_{t'}(t)}{1 + a[\beta \text{tr} \underline{C}^{-1}_{t'} + (1-\beta) \text{tr} \underline{C}_{t'} - 3]^{b/2}} dt' \quad (10)$$

où \underline{C}_t et \underline{C}^{-1}_t désignent respectivement les tenseurs de Cauchy et de Finger.

Les deux premières lois de conservation, correspondantes au cas isotherme, sont associées à la loi de comportement rhéologique. L'ensemble correspond à ce que nous appelons le « problème mécanique ». Ainsi, nous serons amenés à résoudre les trois problèmes suivants :

- le problème mécanique (Méthode des Tubes de Courant (MTC)) : différences finies ;
- le problème thermique, avec l'équation de l'énergie : éléments finis ;
- la cristallisation induite par l'écoulement, à partir d'un modèle représentatif de ce phénomène : différences finies.

La Méthode des Tubes de Courant (MTC) (e.g. Clermont, 1988) comporte le calcul d'une transformation inconnue dans un domaine transformé rectangulaire Ω^* du domaine réel Ω tel que les images des lignes de courant sont des droites parallèles. Nous considérons ici le cas de lignes de courant ouvertes, qui permet de définir une transformation bijective $\mathcal{T}: \Omega^* \rightarrow \Omega$ telle que les lignes images soient des droites parallèles à une direction moyenne de l'écoulement (direction Oz par exemple), avec des variables (x, z) pour le cas plan ou (r, z) dans le cas axisymétrique. Nous pouvons alors écrire les relations suivantes, en considérant une fonction de transformation k dans le cas plan, f dans le cas axisymétrique (les deux sections amont des domaines Ω et Ω^* sont identiques) :

$$\begin{aligned} x &= k(X, Z) & r &= f(R, Z) \\ z &= Z & z &= Z \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{dans le cas plan ,} \\ \text{dans le cas axisymétrique} \end{array} \quad (11)$$

La conservation de la masse est automatiquement vérifiée en MTC, le suivi de particule indispensable à la prise en compte de lois intégrales est simplifié dans le cas stationnaire puisque les trajectoires sont rectilignes et parallèles dans le domaine de résolution Ω^* , où les équations d'équilibre, non linéaires en inconnues k (ou f) s'écrivent formellement comme :

$$E_1[k, \rho] = 0 ; E_2[k, \rho] = 0 \quad , \text{ dans le cas plan } ; \quad E_1[f, \rho] = 0 ; E_2[f, \rho] = 0 \quad , \text{ dans le cas axisymétrique} \quad (12)$$

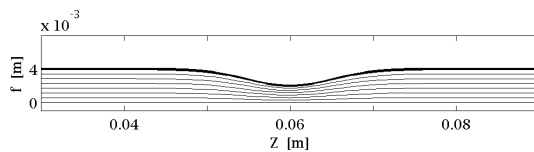
La résolution du problème thermique s'effectue dans un cadre d'éléments finis d'Hermite, à partir des résultats associés au problème mécanique.

En ce qui concerne la cristallisation, les approches liées à leur cinétique de cristallisation expriment la probabilité qu'un point de l'échantillon soit atteint par une entité cristalline à un instant donné dans le cas d'une cristallisation isotherme $F(t)$, ou bien à une température donnée, dans le cas d'une cristallisation anisotherme $F(t, T)$. Le modèle de cristallisation isotherme d'Avrami (1940) exprime la cristallinité relative θ , rapport des degrés respectifs x et x_∞ de cristallinité instantanée et maximum, en fonction du temps t par la relation

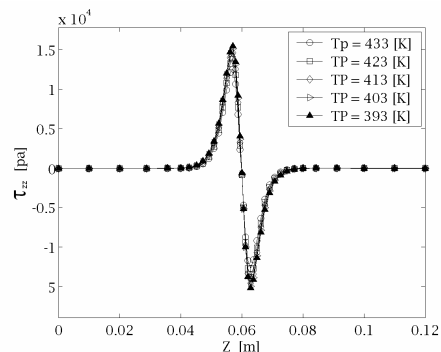
$$\theta = \frac{x}{x_\infty} = 1 - \exp(-F(t)) \quad , \text{ avec } F(t) = K_1 t^n \quad (K_1, n \text{ constante et indice d'Avrami}) \quad (13)$$

Dans ce travail, le cadre thermodynamique des matériaux standards généralisés, utilisé en mécanique des solides pour décrire l'élasticité, la plasticité, l'endommagement et d'autres phénomènes de couplage, est étendu comme dans l'étude d'Ammar (2001) à la description des phénomènes de comportement moléculaire (conformation de chaînes par exemple) ainsi que de changements de phase pour une déformation (ou un taux de déformation) donné.

4 Résultats



(a)



(b)

FIG. 1 – Modèle en loi de Carreau (cas axisymétrique) : (a) Lignes de courant pour une température de paroi $T = 433 \text{ K}$; (b) Contraintes τ^{zz} sur l'axe en fonction de la température de paroi

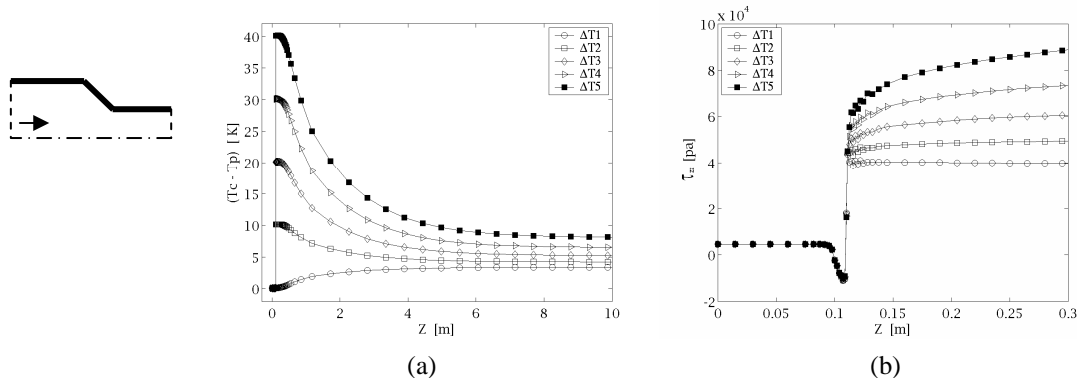


FIG. 2 – Loi intégrale : convergent axisymétrique (a) Températures sur l'axe (b) Contrainte τ^{zz} à la paroi

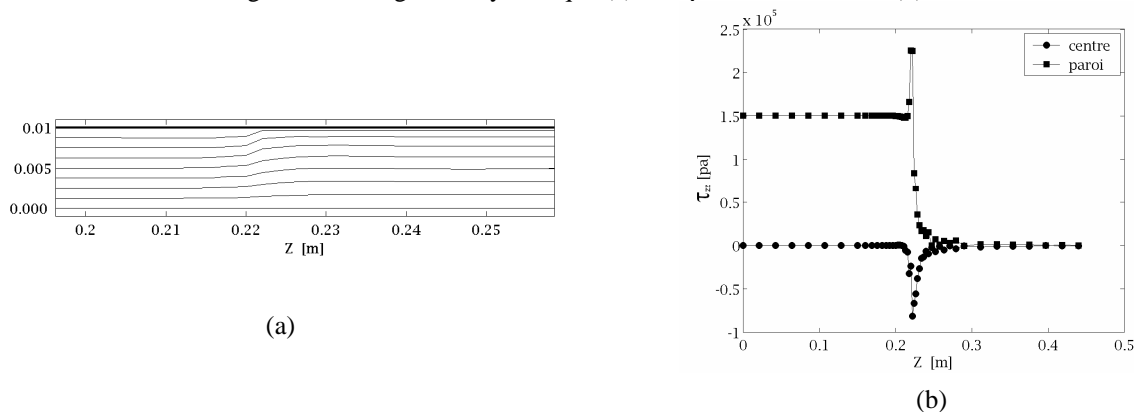


FIG. 3 – Loi intégrale (PEBDL) : transition adhérence-glisement (a) Lignes de courant ; (b) Contraintes sur l'axe et à la paroi

Les Figs. 1 à 3 présentent des exemples de résultats pour les trois domaines d'écoulements types considérés. Les prédictions de lignes de courant pour un fluide à loi de Carreau et l'évolution des contraintes, qui sont pratiquement constantes en fonction de la température de paroi, sont représentées en Fig. 1. La Fig. 2 montre la géométrie de convergent considérée, les températures sur l'axe et les contraintes de cisaillement à la paroi pour différentes conditions de refroidissement à la paroi aval avec le polyéthylène de basse densité linéaire (PEBDL) à loi intégrale de Wagner. Pour ce fluide, la Fig. 3 montre un exemple de lignes de courant et de contraintes calculées dans le cas de la transition adhérence-glisement.

5 Conclusions et perspectives

Les résultats obtenus soulignent les différences des caractéristiques des écoulements étudiés et également le problème de l'efficacité du refroidissement périphérique. L'approche est actuellement développée dans le cadre de la cristallisation dont la formulation théorique a été déjà établie.

Références

- Ammar, A. 2001. Modélisation numérique de la cristallisation induite par l'écoulement d'un thermoplastique. Application à l'injection. Thèse de Doctorat, ENS-Cachan
- Avrami M. 1940. Kinetics of Phase Change. II Transformation-Time Relations for Random Distribution of Nuclei. J. of Chemical Physics, Volume 8, Issue 2, 212-224 (1940)
- Bird, R.B. Armstrong R.C. & Hassager O. 1989. Dynamics of polymer liquids. Wiley, New-York
- Clermont, J.R. 1988. Analysis of incompressible three-dimensional flows using the concept of stream tubes in relation with a transformation of the physical domain. Rheologica Acta 27, 357
- Ferry D. 1980. Viscoelastic properties of polymers, J. Wiley and Sons, New-York
- Guillet J., Carrot C., Arsac A. & Revenu P. 1993. Comportement rhéologique en cisaillement et en élongation de deux polyéthylènes. Test de quelques lois constitutives. Cahiers de Rhéol. (9), no 3-4
- Tadmor Z. & C.G. Gogos. 1979. Principles of Polymer Processing, Wiley and Sons